

综述与专论

离散单元法及其在流态化领域的应用

周池楼, 赵永志

(浙江大学化学工程与生物工程学系, 浙江 杭州 310027)

摘要: 经过三十余年的发展, 离散单元法 (discrete element method, DEM) 已经发展成为一种广泛应用于过程工程领域中颗粒体系研究的数值方法, 特别是将 DEM 与计算流体力学 (computational fluid dynamics, CFD) 相结合形成的 CFD-DEM 耦合方法, 已经在流态化研究领域得到广泛应用。首先对 DEM 模型进行了综述, 包括 DEM 模型的基本原理、颗粒形状模型、接触力模型、非接触力模型、流体作用力模型等; 然后对 CFD-DEM 耦合方法及其在流态化领域的一些主要应用进行了介绍, 包括在流化床、气力输送以及过程工程领域里的一些其他应用。最后对 DEM 模型以及 CFD-DEM 耦合方法的发展趋势进行了预测, 希望能促进 DEM 方法的发展, 并推动其在过程工程领域中的应用。

关键词: 离散单元法; 计算流体力学; 流化床; 流态化; 气力输送

DOI: 10.3969/j.issn.0438-1157.2014.07.014

中图分类号: TQ 018

文献标志码: A

文章编号: 0438—1157 (2014) 07—2520—15

Discrete element method and its applications in fluidization

ZHOU Chilou, ZHAO Yongzhi

(Department of Chemical and Biochemical Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310027, Zhejiang, China)

Abstract: After 30 years of development, the discrete element method (DEM) has developed to be a kind of numerical method of particle systems widely used in process engineering. In particular, the CFD-DEM coupling method has been widely used in the researches of fluidization. The DEM models are reviewed firstly, including the basic principles of DEM model, the particle shape model, the contact force model, the non-contact force model, and the fluid force model. Then the CFD-DEM coupling methods and the applications to fluidization are introduced, including the applications in fluidized bed, pneumatic conveying, and some other fields of process engineering. Finally, the future development of DEM and CFD-DEM coupling methods are presented, hoping to promote the development of DEM and its applications in process engineering.

Key words: discrete element method; computational fluid dynamics; fluidized bed; fluidization; pneumatic conveying

引 言

颗粒体系在自然界中随处可见, 对这些体系的研究不仅具有重大的工程应用背景, 同时也具有重要的科学意义。而在一般的颗粒体系中, 往往存在流体的作用, 如空气、水等的作用, 形成颗粒-流体

相互作用体系。颗粒体系的研究涉及众多领域, 属于跨学科、跨领域的交叉研究范畴, 传统研究方法包括实验研究和理论研究, 但受到时间、经费、适用范围等多方面的限制, 随着计算机技术的飞速发展, 目前数值模拟已成为颗粒系统研究的有力工具。

2014-03-28 收到初稿, 2014-04-14 收到修改稿。

联系人: 赵永志。第一作者: 周池楼 (1987—), 男, 博士研究生。

Received date: 2014-03-28.

Corresponding author: ZHAO Yongzhi, yzzhao@zju.edu.cn

迄今为止, 人们建立了各种数值模型以复现、研究颗粒系统中的复杂结构。其中, 基于颗粒轨道方法的计算颗粒力学模型可直接对颗粒进行跟踪, 确定颗粒运动的详细信息, 从而成为颗粒系统数值模拟领域备受关注的模型。离散单元法 (discrete element method, DEM) 是这类模型中应用最广泛的数学模型, 该模型由 Cundall 等^[1]建立, 其最大特点是颗粒在相互作用中允许发生轻微的形变和重叠, 颗粒发生碰撞并接触后, 相互作用力采用弹簧/阻尼模型进行计算。将 DEM 模型与计算流体力学 (computational fluid dynamics, CFD) 结合便形成 CFD-DEM 方法, 该方法由 Tsuji 等^[2]首次提出, 在 CFD-DEM 方法中流体部分采用 CFD 技术进行预测, 颗粒部分采用 DEM 进行求解, 将二者耦合即可解决流-固两相流动的数值仿真。与传统双流体模型^[3] (two fluid model, TFM) 相比, CFD-DEM 方法是一种普遍适用的模拟气固两相流的方法, 该模型需要的经验参数少, 可方便地考虑颗粒尺寸分布, 能够获得颗粒尺度的微观信息, 可以精确地预测各种流-固两相体系。

本文对 DEM 模型和 CFD-DEM 模型的发展进行了回顾和总结, 并对其在流态化领域的应用进行了介绍。希望通过本文的介绍能促进 DEM 方法的发展, 并推动其在过程工程领域中的应用。

1 DEM 模型

1.1 基本原理

在 DEM 模型中, 某一质量为 m 的颗粒在运动过程中主要受 4 种力的作用, 即自身重力 mg 、颗粒间的接触力 F_c , 如果还存在某些非接触力 F_{nc} , 如范德华力、毛细力、静电力等, 也会对颗粒的运动造成重要影响, 如果颗粒在流体中运动, 则还存在流体对颗粒的作用力 F_f 。根据牛顿第二定律, 该颗粒的平动运动方程为

$$m \frac{dv}{dt} = mg + F_c + F_{nc} + F_f \quad (1)$$

此外, 颗粒还受到力矩的作用而发生转动

$$I \frac{d\omega}{dt} = T \quad (2)$$

式中 m 和 I 分别表示颗粒的质量和转动惯量, v 表示移动速度, ω 表示角速度, t 表示时间, g 为重力加速度。在上述力和力矩的作用下, 颗粒发生移动和滚动。

DEM 模型在处理颗粒碰撞时认为颗粒会发生微小形变, 这比较符合颗粒的实际特性。DEM 模型应用时间驱动算法, 每隔固定的时间步长搜索一次各颗粒的位置, 当两个颗粒部分叠加时即认为两个颗粒发生相互碰撞作用, 这样通过受力分析可以确定颗粒下一步的运动速度和单位时间步长内的位移, 如此循环, 即可确定颗粒运动的轨迹, 当选用较小的时间步长时, 即可精确量化颗粒之间的相互碰撞。DEM 模型的优势在于考虑了颗粒之间相互作用细节, 同时可以考虑某一时刻的多颗粒碰撞, 计算时间不依赖于碰撞发生的次数, 当选定恰当的时间步长后, 其计算时间相对固定, 特别适合于稠密的流态化体系。

1.2 颗粒形状模型

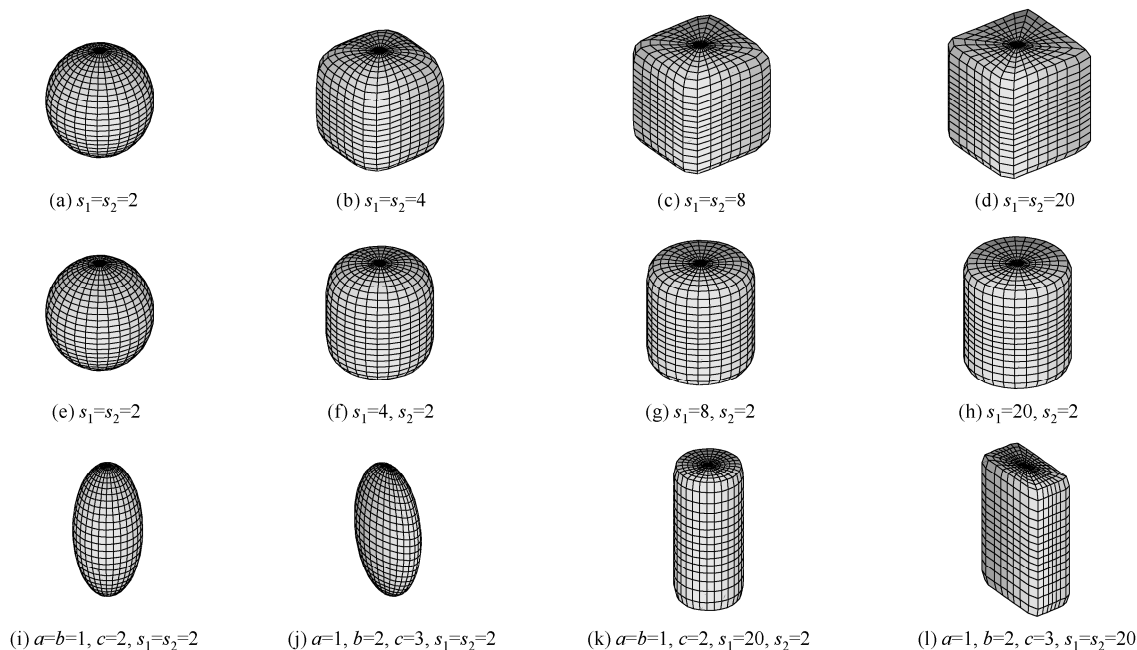
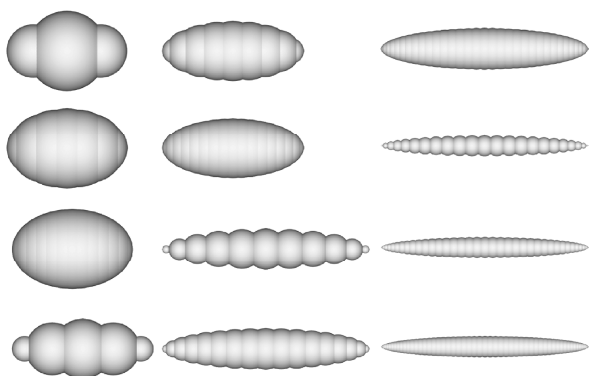
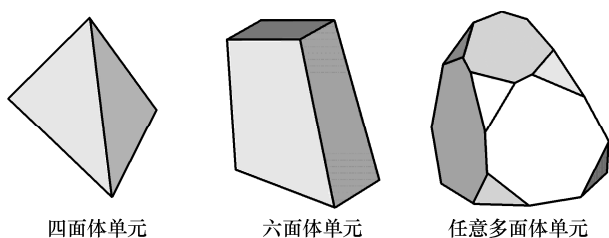
目前为了降低问题的复杂度, DEM 的单元通常假设为球形。虽然球形模型能很好地分析多数颗粒体系问题, 然而现实世界中颗粒形状大多是非球形, 当颗粒几何形状对颗粒运动的影响不能忽略时, 继续使用球形 DEM 模型就可能无法得到准确的结果, 所以需要建立相应的非球形 DEM 模型, 使其更接近物理事实、应用范围更广泛, 能解决更多的科学和工程问题。目前, 对于几何形状复杂的颗粒应用较广泛的 DEM 建模方法主要有超椭球法^[4-11]、组合颗粒法^[12-22]以及多面体模型法^[23]。

1.2.1 超椭球法 超椭球是超二次曲面的一种, 是由二次曲面发展演变而来, 起初用于计算机图形学, 后被引入到 DEM 中描述非球形颗粒, 据统计世界上 80% 的颗粒几何形状可由超椭球方程近似描述^[4]。标准的超椭球方程为

$$\left(\left| \frac{x}{a} \right|^{s_2} + \left| \frac{y}{b} \right|^{s_2} \right)^{\frac{s_1}{s_2}} + \left| \frac{z}{c} \right|^{s_1} = 1 \quad (3)$$

式中 正数 a 、 b 、 c 为颗粒主轴方向的半轴长, 正数 s_1 与 s_2 为形状指数。通过调整 a 、 b 、 c 和 s_1 、 s_2 可以得到常见的各种颗粒, 如图 1 所示。为了提高计算效率及算法的稳定性, 目前大多数这类模型都进行了不同程度的简化^[5-10]。

1.2.2 组合颗粒法 组合型颗粒是由若干形状简单的几何结构组合而成。由于球形颗粒计算简单, 因此常用若干圆球组合成各类非球形颗粒, 如图 2 所示, 可通过改变圆球的数量和半径组成不同的非球形颗粒。求解颗粒运动时先分析每一个球形的受力情况, 然后对组成该颗粒的所有圆球受到的力及力矩求和, 这个合力及合力矩可近似被认为是该颗粒

图 1 采用超椭球方程描述的各种形状的颗粒 (未明确注明者 $a=b=c=1$)Fig.1 Non-spherical particles described by super ellipsoid (not explicitly stated: $a=b=c=1$)图 2 由球形模拟的组合型椭球颗粒^[22]Fig.2 Ellipsoid composed by spherical particles^[22]图 3 多面体颗粒^[24]Fig.3 Polyhedral particles^[24]

所受的力和力矩。这种模型的原理及算法都很简单,易于编程实现。

1.2.3 多面体模型法 多面体方法模拟的非球形颗粒具有多面体几何结构,如图 3 所示,多面体的每一面可由一个平面方程或一个几何拓扑关系矩阵表

示,每个颗粒可由一组平面方程或一组几何拓扑关系矩阵描述。理论上讲,当多面体面数足够多时可以逼近任何形状的颗粒,但当构成颗粒的平面较多时,判断接触的计算量过大,当所研究的颗粒体系含有较多数量的颗粒时,模拟需要耗费很长的计算时间^[24]。

1.2.4 各种模型的比较 上文中介绍的颗粒形状模型都有各自的优点和缺点,在解决不同的问题时可根据要求选取不同模型进行描述,以达到求解精度和求解速度的平衡,在可能的情况下取得最优的结果。表 1 为各类模型优缺点的对比。

1.3 接触力模型

1.3.1 弹簧-阻尼模型 当两个球形颗粒发生碰撞时,首先在接触点处发生弹性变形,颗粒在前进方向受到阻力,该阻力的大小与法向变形位移、颗粒硬度呈一定的比例关系,达到最大位移变形时,颗粒停止运动,沿原来运动的方向反弹,碰撞后颗粒的动能会产生一定的损失,损失的大小与颗粒的弹性阻尼系数及颗粒间的相对速度有关^[25]。当两个颗粒发生偏心碰撞时,相撞点处的接触力可分解为法向分力和切向分力。

在颗粒发生碰撞时,在接触面上发生的变形往往非常复杂,特别是对于非球形的颗粒。目前的 DEM 模型都无法描述接触颗粒间的详细变形,为了提高运算速度,一般使用颗粒间的叠加量代表颗粒

表 1 各种颗粒形状模型的对比

Table 1 Comparison of different particle models

模型	优点	缺点
球形模型	精确、求解速度快	无法描述非球形颗粒
超椭圆模型	精确，可近似描述大部分非球形颗粒，求解速度较快	无法描述存在凹面结构的颗粒以及多面体颗粒
组合颗粒模型	可以描述任何形状的颗粒	与物理事实存在一定的偏差，求解精度较低
多面体模型	可逼近任何形状的颗粒	计算量大，较难处理存在凹面结构的颗粒，颗粒间精确的力学模型较难建立

间的变形。弹簧-阻尼模型就是通过该叠加量求取颗粒间作用力的数学模型，为了较准确而快捷地获得颗粒间作用力，研究者们建立了多种模型，但总体上可以分为线性弹性-阻尼模型和非线性弹性-阻尼模型。线性弹性-阻尼模型是 Cundall 等^[1]首次提出 DEM 方法时采用的模型，也是目前应用最为广泛的模型，该模型采用线性的弹簧模型，即假设颗粒间的弹性力与变形量呈正比。虽然该模型与真实的物理过程有较大的差距，但 DEM 研究领域的学者们发现采用该模型预测的宏观颗粒体系运动特性与真实物理过程基本相同，这说明颗粒体系内的混沌作用，在一定程度上消减了基本物理模型不精确造成的一些误差。相对于线性弹性-阻尼模型，非线性弹性-阻尼模型^[26]与颗粒间的真实相互作用更为一致，因为颗粒间的作用本身是个复杂的非线性过程。目前较为常用的非线性模型是基于 Hertz 接触理论^[27]建立的，多位研究者采用了以 Hertz 接触理论为基础发展的非线性模型^[26,28-30]，这类模型虽然较为复杂，但相对于线性弹性-阻尼模型可更加准确地描述颗粒体系的运动特征。

关于颗粒间叠加量的求解，对球形颗粒而言非常简单，对于组合颗粒模型，由于也是由球形颗粒组成，叠加量的求解也同样简单。但对于超椭圆模型和多面体模型，颗粒间的叠加量、力的作用点和方向等都很难求解，由于此非本文讨论的重点，因此这里不再详述。

1.3.2 四方程模型 自从 Cundall 等^[1]首次提出 DEM 模型以来，很多学者对其进行了改进。DEM 模型有很多先天缺陷，这些缺陷阻碍了该方法的发展，然而现存模型中的后天不足，也一定程度上降低了方法的准确性，如在目前大多数已发表的文献中，DEM 模型并没有考虑滚动摩擦的影响。直到近年来滚动摩擦才被引入 DEM 模型中，其重要性也得到充分的证实^[25,31-33]，在这些模型中，颗粒间的作用被充分考虑，包括法向力、切向力以及力矩（包括切向力造成的力矩以及滚动摩擦力矩）。该模型仍

可进一步细化，将颗粒间的力矩进一步分为法向力矩和切向力矩，改进后的模型是离散单元法中较为完善的模型之一。

当两个颗粒发生偏心碰撞时，相撞点处的接触力可分解为法向分力和切向分力，同时颗粒间还存在着滚动摩擦力矩，也可分解为法向分力矩和切向分力矩两部分。每种作用力和力矩都可以简化为一个弹簧（本文中以线性弹簧模型进行说明）、一个阻尼以及一个滑动器，如图 4 所示，该模型可用 4 组弹性-阻尼方程式描述，故可称为四方程弹性-阻尼模型。颗粒间的作用力和变形之间的关系见图 5，法向接触力的值与法向变形呈正比，切向力和滚动摩擦力矩（含法向和切向）分别与切向变形和扭曲变形（含法向和切向）呈正比，但其最大值分别受到滑动摩擦系数和滚动摩擦系数（含法向和切向）与法向力乘积的限制。

1.4 非接触力模型

在颗粒运动时，除受重力和接触力外，颗粒彼此之间还可能还存在其他非接触作用力，这些作用力在很多情况下可以决定颗粒的运动状态。常见的非接触力主要包括范德华力、毛细力和静电力。

1.4.1 范德华力模型 范德华力是一种颗粒间的内

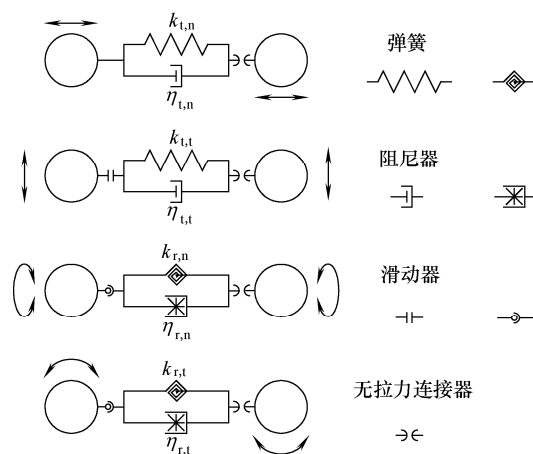


图 4 四方程弹性-阻尼离散单元模型

Fig.4 Four-equations spring-dashpot DEM model

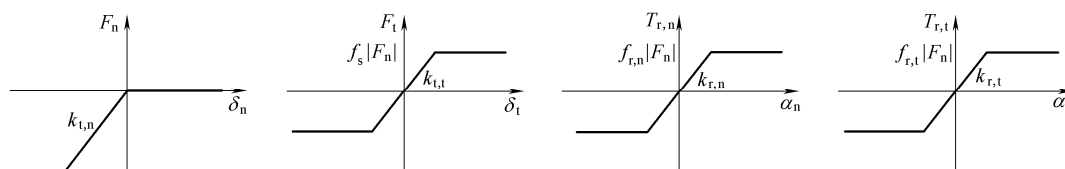


图 5 颗粒间作用力(矩)和变形之间的关系

Fig.5 Relations between forces (torques) and deformations

聚力,当颗粒粒径较大时该力的数值远小于颗粒间的接触力和颗粒所受重力^[34],因此在进行颗粒体系的 DEM 模拟时往往忽略该力的影响。但在有些情况下范德华力对改变颗粒运动状态^[35-37]有非常重要的影响,如纳米尺度^[38]、微米尺度^[39-42]的颗粒运动。由于构成颗粒的原子或分子,特别是颗粒表面的原子或分子的电子运动,造成颗粒有极性。当两颗粒相互靠近接触时,由于颗粒极性的作用,两颗粒之间将产生相互吸引的作用力,此作用力就是颗粒间的范德华力。根据 Hamaker 理论^[43],颗粒周围的气体、颗粒的接触变形、颗粒的表面粗糙度等因素都会影响颗粒间范德华力,范德华力模型有多种,文献^[34]中的模型是使用较多的一种。颗粒之间的范德华力是一种很难准确描述的作用力,目前关于范德华力模型的研究仍在继续开展。

1.4.2 毛细力模型 在过程工业中有很多与湿颗粒体系有关的工艺过程,湿颗粒间的毛细力是描述湿颗粒体系流动特性的一个基本物理量,如果能得到较精确的描述毛细力的数学模型,便可以将其应用到颗粒体系的计算仿真中,推动相关领域的发展。迄今为止,已有多位学者建立了多种数学模型描述湿颗粒体系中的毛细力(因在很多情况下毛细力为桥状,因此又可称为液桥力),在这些模型中液桥力通常认为与其形状、固液接触角以及填充角有关^[44]。其中部分学者在计算液桥力时,使用的是基于液桥形状为精确解析解的旋转体的力学模型^[45-48],但由于使用精确的液桥模型推导出的公式非常复杂,以致计算过程繁复,不利于大规模颗粒体系的数值模拟计算。因此很多学者在计算误差允许的范围内提出了多种简化计算方法,如认为液桥的形状是由一条圆弧线段绕主轴旋转而成的曲面作为侧面的曲面柱体^[49]。在这类模型中,以往的研究大部分只考虑了两个等径球形颗粒之间的液桥力^[45,50-52],且很多模型只考虑了固液接触角为零时的液桥力^[53-55],这与物理事实不符。为此 Mehrotra 等^[44]提出了一种既考虑球形颗粒不等径情况,又考虑了固液接触角不为零情况的计算液桥力和液桥体积的模型,但是这个

模型只分析得到了两球接触时的液桥力,并没有讨论两个球形颗粒之间存在距离时的液桥力。为此,Chen 等^[56]发展建立了一种较完善的数学模型,推导出了颗粒不等径、固液接触角不为零且颗粒之间存在距离时的液桥力和液桥体积的计算公式。

当然,上文只讨论了静态时的液桥力,如果颗粒体系是在运动中,还要将颗粒之间相对运动造成的黏性力计算在内,它与颗粒间的相对运动速度有关^[57-62],但到目前为止,计算黏性力的模型还很不完善。湿颗粒间的毛细力作用非常复杂,目前的数学模型仅解决了球形颗粒间、低含液量且是静态液桥力的描述,非球形颗粒间、高含液量的静态液桥力以及动态黏性力的数学模型都还很不完善,亟需进行进一步的深入研究。

1.4.3 静电力模型 颗粒体系中的颗粒在相互碰撞和摩擦或静电场的作用下常常会带电,当颗粒带电后,颗粒之间会存在静电力的作用,带电颗粒间的静电力通常用经典的库仑方程描述。

1.5 流体作用力模型

当颗粒在流体中运动时,流体和颗粒之间会发生相互作用。颗粒受到的流体作用力主要是拖曳力,除曳力之外,颗粒还会受到浮力、虚拟质量力、Basset 力、Magnus 力、Saffman 力等多种力的作用。但在流体中,特别是在气体中,这些力的作用相对曳力来说往往很小,因此在很多情况下只需计算曳力,而忽略其他力的作用。单个颗粒在流体中所受的曳力比较容易获得,相对于单个颗粒,对于在流体中运动的颗粒群,曳力的求取变得比较复杂,因为对其中的某个颗粒而言,其他颗粒的存在会很大程度上影响它的受力情况。目前,在 DEM 模型中使用较多的主要是两种基于实验建立的半经验模型,一种是 Ergun 和 Wen & Yu 模型^[63-64],另外一种 Di Felice 模型^[65]。

2 CFD-DEM 模型

自 DEM 方法诞生以来,一直被用在纯颗粒体系的研究中,直到 1993 年 Tsuji 等^[2]首先将 DEM 和 CFD 耦合,用来模拟鼓泡流化床内的流动行为,而

后 CFD-DEM 方法被越来越多地应用到各种流-固两相流的研究中^[66-81]。CFD-DEM 方法中数学模型可分为 3 部分: 第 1 部分为离散相模型, 即 DEM 模型; 第 2 部分是连续相模型, 即 CFD 模型; 第 3 部分是 CFD 和 DEM 的耦合模型。DEM 模型已在上文中进行了详细介绍, 下面主要介绍连续相模型和 CFD-DEM 耦合模型。

对于流体部分, 采用连续介质模型进行分析。流体的流动规律可用气固两相耦合的 Navier-Stokes 方程描述。其中连续性方程为

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_f \rho_f) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\alpha_f \rho_f u_j) = 0 \quad (4)$$

动量方程为

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_f \rho_f u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\alpha_f \rho_f u_i u_j) = \\ -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\alpha_f \mu_{\text{eff}} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + F_s \end{aligned} \quad (5)$$

式中 α_f 表示气体分数, ρ_f 表示空气密度, p 表示压力, u 表示速度, x 表示坐标, μ_{eff} 为有效黏性, F_s 为颗粒相对流体相的作用力。

颗粒在流体中运动时, 颗粒与流体之间存在着复杂的相互作用, 流体对颗粒的作用力包括曳力、浮力、Saffman 力、虚拟质量力等。在流体对颗粒作用的同时, 根据牛顿第三定律, 颗粒也会对流体产生作用力, 对于欧拉-拉格朗日方法, 一般采用所谓的流体单元中颗粒源项方法来实现双向耦合。该方法把离散的颗粒相看作是连续的流体相的质量、动量源, 在处理动量方程时, 把处于某流体网格单元内所有颗粒受到的流体作用力的反作用力累加起

来, 作为附加源项赋给气相动量方程。

3 流态化领域的应用

自从 DEM 方法建立以来, 已在研究领域得到迅速的发展, 但在工业应用领域仍受到诸如计算能力、模型真实程度等方面的限制, 随着计算机技术、高性能计算技术及建模能力的发展, 离散单元方法逐渐得到工业界的认可。本文总结介绍了 CFD-DEM 方法在流态化领域的一些主要应用, 包括在流化床、气力输送以及过程工程领域中的一些其他应用。

采用 CFD-DEM 方法模拟流化床应用最为广泛, 包括鼓泡流化床、上行床、下行床等。鼓泡流化床是 CFD-DEM 方法最早获得应用的领域, 众多学者^[2,66-67,81-89]曾采用该方法对鼓泡床进行了一系列的研究, 但文献中大部分 CFD-DEM 方法一般仅对几何结构较简单的气固系统进行模拟。由于流化床一般具有较复杂的内部结构, 采用结构化的矩形网格无法对流场进行划分, 在 CFD-DEM 方法发展的早期, 有些学者曾采用结构化网格 CFD 耦合 DEM 方法对具有复杂结构的埋管流化床内的气固运动进行过模拟^[69,90], 他们采用了方形网格对整个区域进行划分, 但需将划分在圆管区域的网格的参数进行特殊处理, 等效为固体。该方法虽然可以解决 CFD 中复杂边界问题, 但由于在圆管壁面处固体和流体网格存在交错而成锯齿状, 因此将影响流场计算的精度。赵永志等^[79-81]将非结构化网格 CFD 技术引入 DEM 中, 有效地解决了复杂设备内的颗粒流动模拟, 图 6 为利用该方法模拟埋管流化床内气

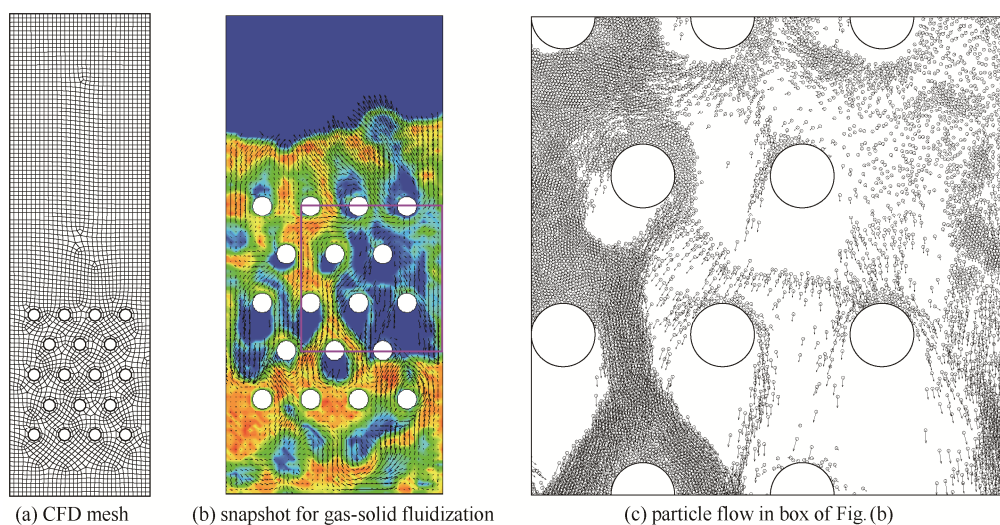
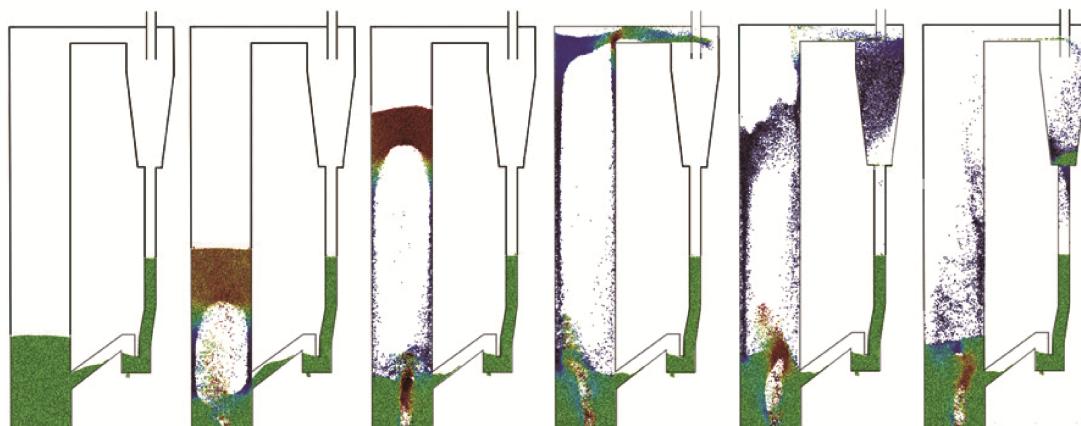


图 6 利用 CFD-DEM 方法模拟的埋管流化床^[80]

Fig.6 Snapshot for gas-solid fluidization in fluidized bed with immersed tubes simulated by using CFD-DEM method^[80]

图 7 利用 CFD-DEM 方法模拟循环流化床^[92]Fig.7 Snapshot for gas-solid fluidization in CFB simulated by using CFD-DEM method^[92]

固两相流动的计算结果, 获得了采用传统方法无法得到的详细的颗粒运动的信息。

近年来, 随着非结构化网格 CFD 技术与 DEM 的结合, CFD-DEM 方法逐渐被应用到更为复杂的循环流化床的研究中, 用于揭示流化床内复杂的气固运动并探讨床内颗粒聚团的形态和形成原因。Chu 等^[91]首先利用 CFD-DEM 技术对一个完整的三维循环流化床进行了数值模拟, 而后 Alobaid 等^[92]也采用 CFD-DEM 技术对一个完整的三维循环流化床进行了数值模拟, 如图 7 所示, 但由于 DEM 的计算量太大, 模拟的循环床内的颗粒数量仍然较少, 颗粒数量一般少于 10^6 个, 与真实的循环流化床尚有一定的差距。

由于真实的循环床内的颗粒数量巨大, 目前的计算能力还无法运用 CFD-DEM 方法对其进行全尺度的模拟, 为了研究其中的颗粒团聚规律和机制, 目前大部分针对循环床的模拟还停留在二维或局部。Zhang 等^[36]及 Zhao 等^[78]便利用该方法对提升管内的颗粒聚团现象进行了模拟和分析, 得到了与实验一致的结果(图 8), 加深了研究者们对提升管内复杂的气固两相运动的理解。

下行床是一种气固并流顺重力场下行反应器, 它具有众多优点, 如床内气固两相流动比较均匀, 轴向返混小, 适用于快速超短接触反应, 尤其中间产物为理想产物的复杂反应体系, 如催化裂化等重要的工业过程^[94], 因此在国际工业界和学术研究领域一直受到重视。近年来, 多位学者曾采用 CFD-DEM 耦合方法对下行床系统进行模拟计算分析, 从微观和宏观两个层面对颗粒聚集行为与反应器宏观流动行为之间的关系进行分析研究, 该方法能帮助研究

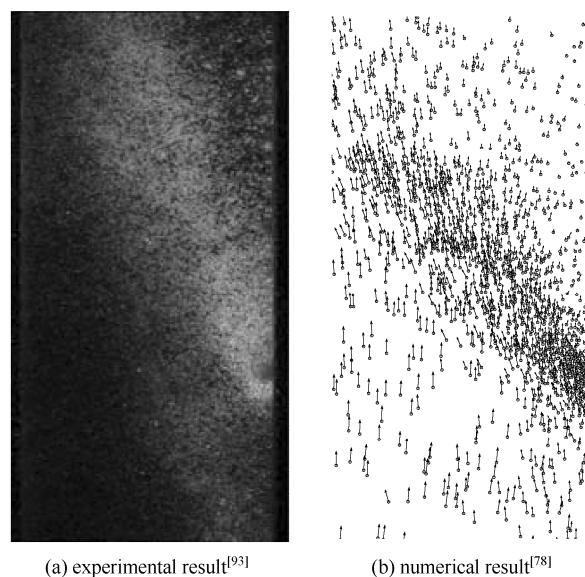


图 8 提升管内的颗粒聚团现象

Fig.8 Cluster in riser

者有效地理解下行床反应器复杂的气固流动现象。Limtrakul 等^[95]和 Zhao 等^[96]将 CFD-DEM 耦合方法应用到三维下行床的研究, 如图 9 (a)所示, 但同样由于计算量太大, 模拟的下行床内的颗粒数量仍然较少, 与真实的流化床尚有一定的差距。目前的计算能力还无法运用 CFD-DEM 方法对其进行全尺度的模拟, 为了研究下行床中的颗粒团聚规律和机制, 目前大部分针对下行床的模拟同样是二维的。Zhao 等^[97]就利用二维模型对下行床内的颗粒聚团现象进行了模拟和分析, 得到了与实验一致的结果, 如图 9 (b)所示。

除鼓泡流化床、上行床、下行床外, 一些研究者还将 CFD-DEM 方法应用到特殊类型的流化床

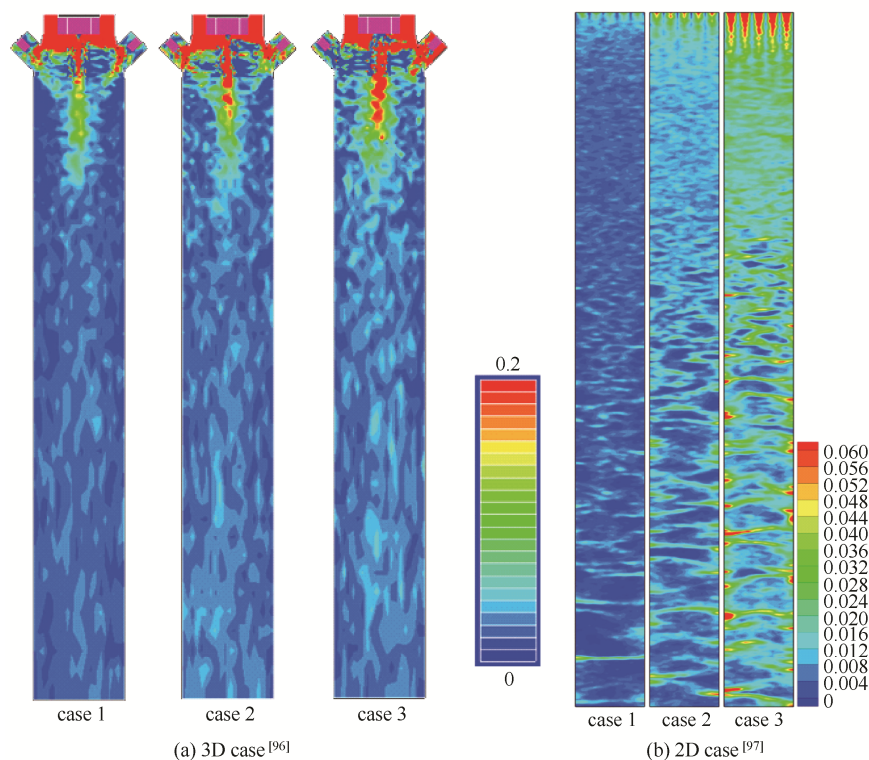


图 9 利用 CFD-DEM 方法模拟下行床

Fig.9 Snapshots of flow pattern in downer simulated by using CFD-DEM method

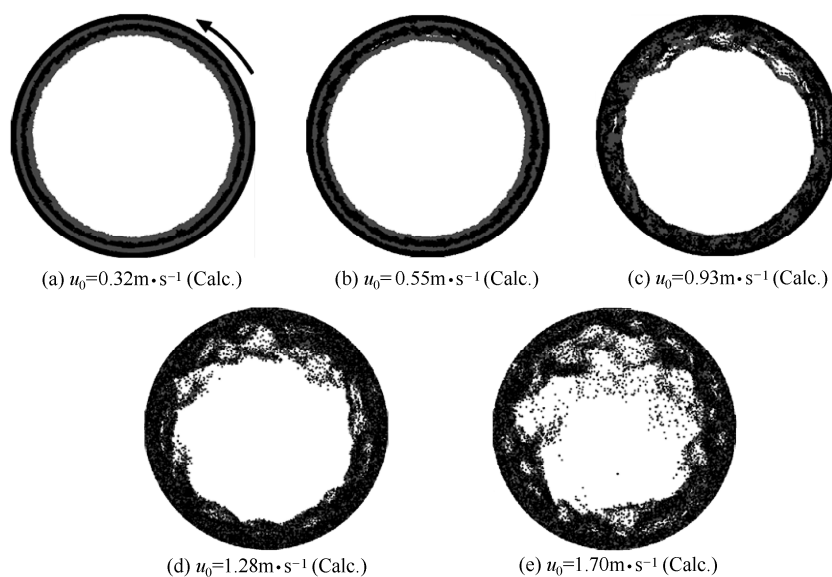


图 10 利用 CFD-DEM 方法模拟不同表观气速下的旋转流化床 (10 倍重力加速度) [98]

Fig.10 Fluidization regimes in rotating fluidized bed under various superficial gas velocities by using CFD-DEM method (10g) [98]

中。Nakamura 等^[98-100]将 CFD-DEM 方法应用在旋转流化床的研究中, 可得到超重力环境下的颗粒流化状态, 如图 10 所示; 江茂强等^[101]将 CFD-DEM 方法应用到新型静态旋转流化床的研究, 得到了与 Nakamura 等相似的研究结果; Kawaguchi 等^[70]将

CFD-DEM 方法应用到喷动床, 赵永志等^[79]将其应用到导流管喷动床的研究, Yang 等^[102]将其应用到双喷嘴喷动床的研究; Hassani 等^[103]模拟了电场作用下的流化床内的运动状态; 除用在气固流化床外, CFD-DEM 方法还被应用于液固流化床的研

究^[104-106]。

上文中介绍的 CFD-DEM 方法模拟流化床大都未考虑其中的化学反应, 仅研究其中的流化特性。近年来, 随着研究的深入和计算技术的发展, 化学模型也被引入 CFD-DEM 方法。Li 等^[107]将化学反应与 CFD-DEM 结合获得了床内反应气体的变化; Geng 等^[108]以及 Liu 等^[109]将燃烧模型应用到鼓泡流化床内, 研究了其中的燃烧特性; Simsek 等^[110]将其应用到排炉燃烧中, Zhou 等^[111]将其应用到富/贫燃料燃烧器的研究; Wu 等^[112-113]将化学反应引入 CFD-DEM 方法, 对提升管和下行床内的催化裂化过程进行了分析。

CFD-DEM 方法除在流化床反应器的模拟应用外, 一个重要的应用领域便是气力输送。由于气力输送的能量消耗较大, 颗粒易受破损, 设备也易受

磨蚀, 因此有必要对其进行细观的研究, 以帮助设计人员改进设备, 减少能耗及磨损。在数值方法中, 一直以来并没有好方法能对气力输送过程进行数值分析, 直到 CFD-DEM 方法的出现, 使得该过程能通过数值方法进行微观机制方面的研究。众多学者^[73,91,114-121]曾采用该方法对水平管内的气力输送进行了数值研究, 发现了与实验观测一致的气固运动形态, 如图 11 所示。对于垂直管道内的气力输送, 也有多位学者^[76,91,117,122-123]采用 CFD-DEM 方法进行了研究, 同样发现了与实验观测一致的气固运动形态。

除应用在流化床和气力输送外, CFD-DEM 方法还被应用在各种与颗粒体系相关的过程工业中, 如旋风分离器^[91,124]。在以往对旋风分离器的数值研究中, 通常不考虑颗粒之间的碰撞, 当气体含尘较

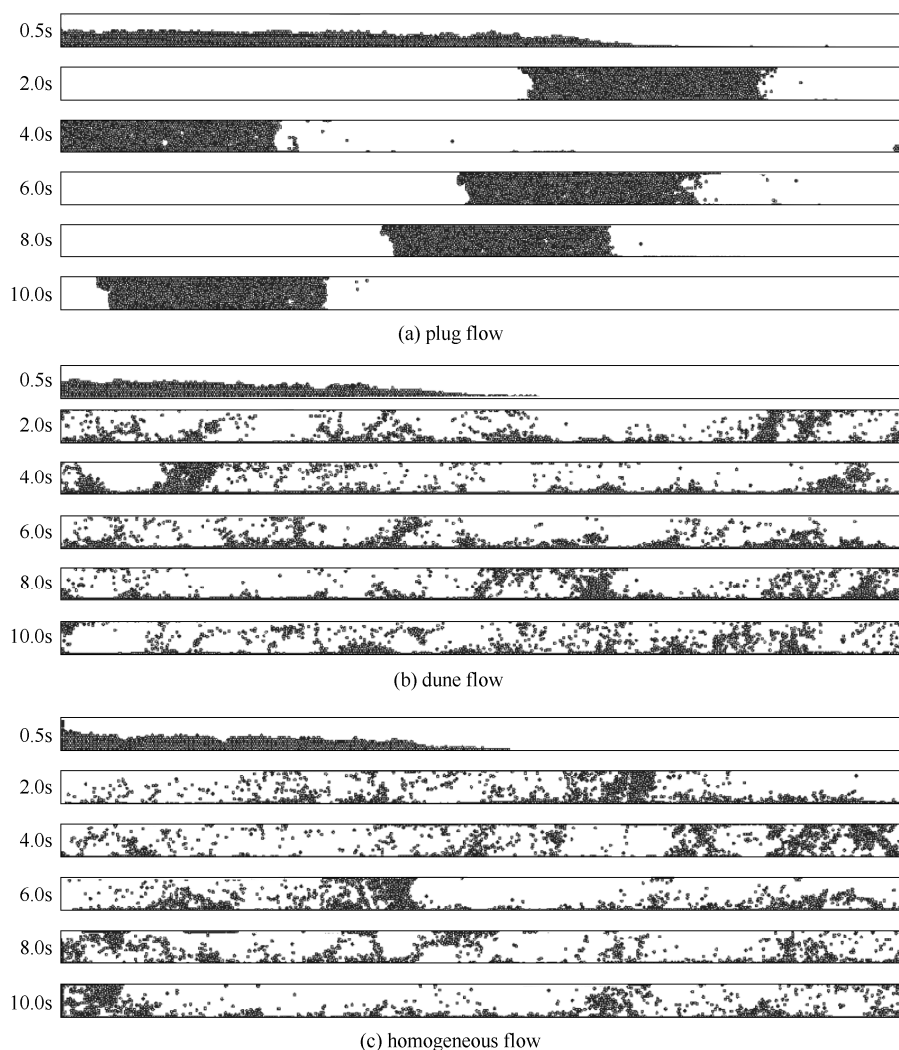
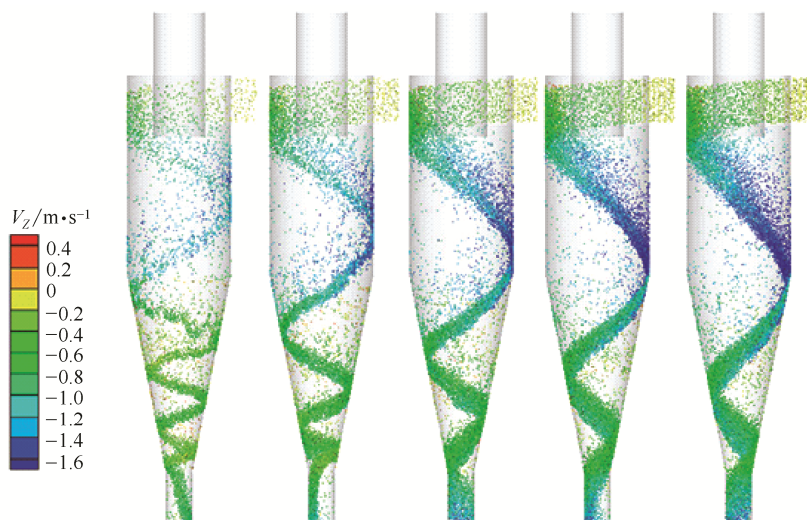
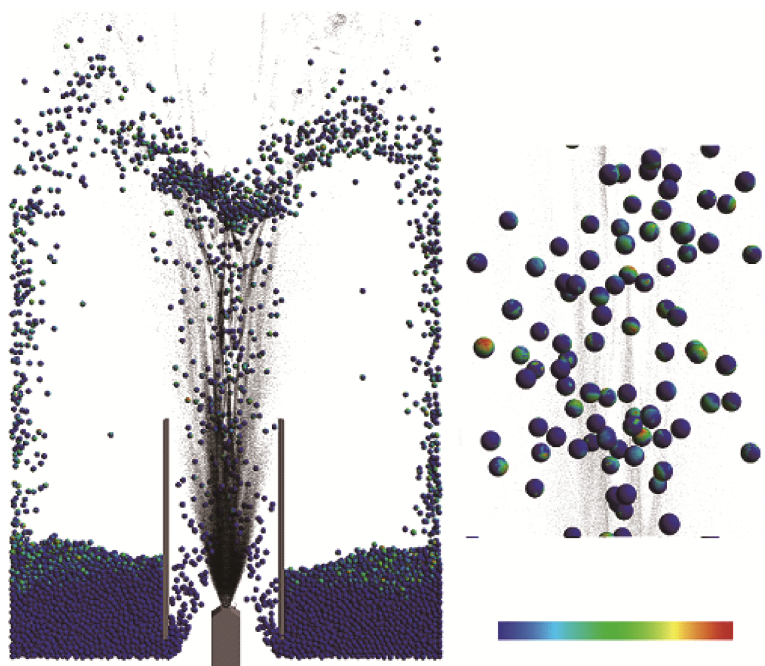


图 11 利用 CFD-DEM 方法模拟水平管内的气力输送^[117]

Fig.11 Snapshots of pneumatic conveying in horizontal pipe simulated by using CFD-DEM method^[117]

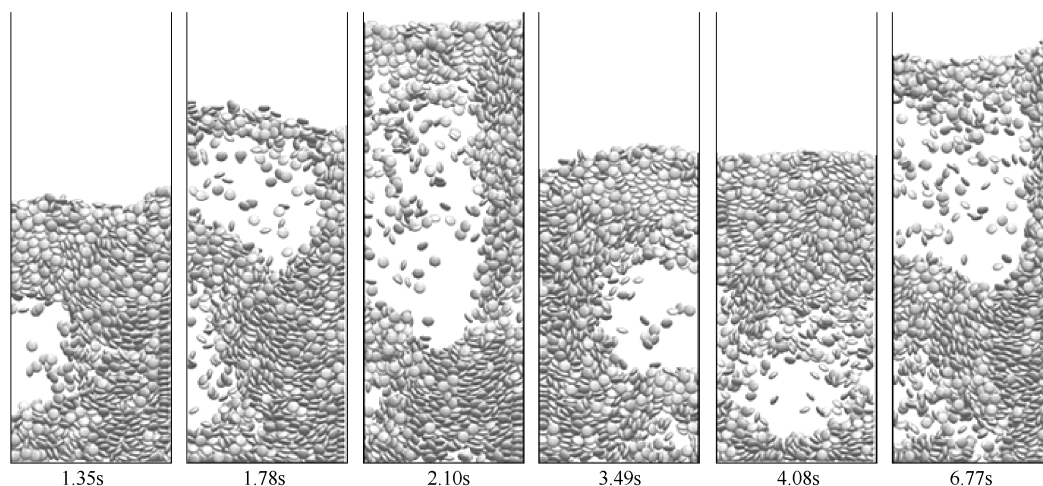
图 12 利用 CFD-DEM 方法模拟旋风分离器^[124]Fig.12 Snapshot for gas-solid flow in cyclone simulated by using CFD-DEM method^[124]图 13 利用 CFD-DEM 方法模拟颗粒喷涂过程^[131]Fig.13 Snapshot for spray coating simulated by using CFD-DEM method^[131]

多时,往往无法对其进行准确的模拟,而 CFD-DEM 方法解决了这个难题,可对除尘过程进行精确的模拟。Chu 等^[91,124]便采用此方法对旋风分离器除尘过程进行了数值模拟,得到了令人满意的结果,如图 12 所示。

在过程工业中,CFD-DEM 方法还应用于炼铁高炉^[125-129]、颗粒涂装过程^[130-131](图 13)、移动床^[132-133]、固定床^[134]、填充床^[135-136]、干燥过程^[137-138]、喷射研磨^[139]、造粒^[140-141]、煤粉分配器^[142]、炉排

燃烧^[110]、充模过程^[143]、粉磨过程^[144]、颗粒吸入器^[145]、离心分离器^[146]、设备磨损预测^[147-148]等诸多与颗粒体系相关的领域,采用高效并行算法的计算规模已达到 100 万颗粒以上^[149-152]。近年来,随着 DEM 和 CFD 技术的发展,非球形颗粒 CFD-DEM 方法^[153-154]

(图 14)以及动边界 CFD-DEM 方法^[155]已经出现,相信随着计算机技术和 DEM 模型的不断发展,CFD-DEM 耦合方法将逐渐被应用到各种流-固体系的研究中。

图 14 利用 CFD-DEM 方法模拟非球形颗粒流化床^[153]Fig.14 Snapshot for fluidized bed with non-spherical particles simulated by using CFD-DEM method^[153]

4 结 语

自从 DEM 方法建立以来,已在研究领域得到了迅速的发展,但在工业应用领域仍受到诸如计算能力、模型真实程度等方面的限制,但随着计算机技术、高性能计算技术及建模能力的发展,离散单元方法逐渐得到工业界的认可,也必然会得到广泛的应用。目前,离散单元模拟已从早期的处理含几千个颗粒的二维圆形颗粒体系发展到可处理大规模复杂颗粒体系的系统,预计在未来的 10 年内,离散单元法模拟技术将具有以下一些特点:①颗粒数量非常巨大,计算颗粒数量可达 $10^8 \sim 10^9$;②颗粒形状可为球形,也可为任意非球形颗粒;③较宽的颗粒大小范围;④可处理具有复杂外边界设备内的颗粒流动问题;⑤可处理颗粒破碎问题;⑥高度耦合的模型,包括 CFD-DEM、FEM-DEM 等,可处理各种相关复杂问题;⑦高度并行化求解。在这些技术的支持下,DEM 方法将在与颗粒系统密切相关的过程工程领域获得广泛的应用,以促进相关行业的发展。

References

- [1] Cundall P A, Strack O D L. A discrete numerical model for granular assemblies [J]. *Geotechnique*, 1979, **29**: 47-65
- [2] Tsuji Y, Kawaguchi T, Tanaka T. Discrete particle simulation of two dimensional fluidized bed [J]. *Powder Technology*, 1993, **77**: 79-87
- [3] Gidaspow D. *Multiphase Flow and Fluidization*[M]. San Diego: Academic Press, 1994
- [4] Williams J R, Pentl A P. Superquadrics and model dynamics for discrete elements in interactive design [J]. *Engineering Computations*, 1992, **9**: 115-127
- [5] Cleary P W. Industrial particle flow modeling using discrete element method [J]. *Engineering Computations: International Journal for Computer-Aided Engineering and Software*, 2009, **26**: 698-743
- [6] Cleary P W, Morrison R D. Particle methods for modelling in mineral processing [J]. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 2009, **23**: 137-146
- [7] Djordjevic N, Morrison R, Loveday B, Cleary P. Modelling comminution patterns within a pilot scale AG/SAG mill [J]. *Minerals Engineering*, 2006, **19**: 1505-1516
- [8] Delaney G W, Cleary P W, Sinnott M D, Morrison R D. Novel application of DEM to modeling comminution processes//9th World Congress on Computational Mechanics and 4th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics[C].2010: 12099
- [9] Hilton J E, Mason L R, Cleary P W. Dynamics of gas-solid fluidised beds with non-spherical particle geometry [J]. *Chemical Engineering Science*, 2010, **65**: 1584-1596
- [10] Cleary P W. Large scale industrial DEM modeling [J]. *Engineering Computations*, 2004, **21**: 169-204
- [11] Chen Youchuan (陈友川). Study of contacting discrete element model based on superquadrics [D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2012
- [12] Favier J F, Abbaspour-Fard M H, Kremmer M, Raji A O. Shape representation of axisymmetrical, non-spherical particles in discrete element simulation using multi-element model particles [J]. *Engineering Computations*, 1999, **16**:467-480
- [13] Song Y, Turton R, Kayihan F. Contact detection algorithms for DEM simulations of tablet-shaped particles [J]. *Powder Technology*, 2006, **161**: 32-40
- [14] Kruggel-Emden H, Rickelt S, Wirtz S, Scherer V. A study on the validity of the multi-sphere discrete element method [J]. *Powder Technology*, 2008, **188**: 153-165
- [15] Abbaspour-Fard M H. Theoretical validation of a multi-sphere, discrete element model suitable for biomaterials handling simulation [J]. *Biosystems Engineering*, 2004, **88**: 153-161
- [16] Favier J F, Abbaspour-Fard M H, Kremmer M. Modeling nonspherical particles using multisphere discrete elements [J].

- Journal of Engineering Mechanics*, 2001, **127**: 971-977
- [17] Lee H, Kwon J H, Kim K H, Cho H C. Application of DEM model to breakage and liberation behaviour of recycled aggregates from impact-breakage of concrete waste [J]. *Minerals Engineering*, 2008, **21**: 761-765
 - [18] Wang L, Park J Y, Fu Y. Representation of real particles for DEM simulation using X-ray tomography [J]. *Construction and Building Materials*, 2007, **21**: 338-346
 - [19] Schubert W, Khanal M, Tomas J. Impact crushing of particle-particle compounds—experiment and simulation [J]. *International Journal of Mineral Processing*, 2005, **75**: 41-52
 - [20] Jensen R P, Bosscher P J, Plesha M E, Edil T B. DEM simulation of granular media-structure interface: effects of surface roughness and particle shape [J]. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 1999, **23**: 531-547
 - [21] Abou-Chakra H, Baxter J, Tüzün U. Three-dimensional particle shape descriptors for computer simulation of non-spherical particulate assemblies [J]. *Advanced Powder Technology*, 2004, **15**: 63-77
 - [22] Markauskas D, Kačianauskas R, Dziugys A, Navakas R. Investigation of adequacy of multi-sphere approximation of elliptical particles for DEM simulations [J]. *Granular Matter*, 2010, **12**: 107-123
 - [23] Nezami E G, Hashash Y M A, Zhao D, Ghaboussi J. A fast contact detection algorithm for 3-D discrete element method [J]. *Computers and Geotechnics*, 2004, **31**: 575-587
 - [24] Zhu Tao (祝涛). Study of contact algorithm for 3-D discrete element method [D]. Wuhan: Huazhong University of Science & Technology, 2009
 - [25] Zhao Yongzhi (赵永志), Cheng Yi (程易), Zheng Jinyang (郑津洋). Three-equation linear spring-dashpot DEM model and the determination of contact parameters [J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics* (计算力学学报), 2009, **26** (2): 239-244
 - [26] Langston P A, Tuzun U, Heyes D M. Continuous potential discrete particle simulations of stress and velocity-fields in hoppers-transition from fluid to granular flow [J]. *Chemical Engineering Science*, 1994, **49**: 1259-1275
 - [27] Hertz H. Über die Berührung fester elastischer Körper [J]. *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, 1882, **92**: 156-171
 - [28] Langston P A, Tuzun U, Heyes D M. Discrete element simulation of granular flow in 2D and 3D hoppers—dependence of discharge rate and wall stress on particle interactions [J]. *Chemical Engineering Science*, 1995, **50**: 967-987
 - [29] Langston P A, Tuzun U, Heyes D M. Discrete element simulation of internal-stress and flow-fields in funnel flow hoppers [J]. *Powder Technology*, 1995, **85**: 153-169
 - [30] Zhou Y C, Wright B D, Yang R Y, Xu B H, Yu A B. Rolling friction in the dynamic simulation of sandpile formation [J]. *Physica A*, 1999, **269**: 536-553
 - [31] Iwashita K, Oda M. Rolling resistance at contacts in simulation of shear band development by DEM [J]. *Journal of Engineering Mechanics, ASCE*, 1998, **124**: 285-292
 - [32] Iwashita K, Oda M. Micro-deformation mechanism of shear banding process based on modified distinct element method [J]. *Powder Technology*, 2000, **109**: 192-205
 - [33] Oda M, Iwashita K. Study on couple stress and shear band development in granular media based on numerical simulation analyses [J]. *International Journal of Engineering Science*, 2000, **38**: 1713-1740
 - [34] Chen J, Anandarajah A. van der Waals attraction between spherical particles [J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 1996, **180**: 519-523
 - [35] Dong K J, Zou R P, Yang R Y, Yu A B, Roach G. DEM simulation of cake formation in sedimentation and filtration [J]. *Minerals Engineering*, 2009, **22**: 921-930
 - [36] Zhang M H, Chu K W, Wei F, Yu A B. A CFD-DEM study of the cluster behavior in riser and downer reactors [J]. *Powder Technology*, 2008, **184**: 151-165
 - [37] Yang R Y, Zou R P, Yu A B. Computer simulation of the packing of fine particles [J]. *Physical Review E*, 2000, **62**: 3900-3908
 - [38] Moreno-Atanasio R, Antony S J, Williams R A. Influence of interparticle interactions on the kinetics of self-assembly and mechanical strength of nanoparticulate aggregates [J]. *Particuology*, 2009, **7**: 106-113
 - [39] Ye M, van der Hoef M A, Kuipers J A M. A numerical study of fluidization behavior of Geldart A particles using a discrete particle model [J]. *Powder Technology*, 2004, **139**: 129-139
 - [40] Lu N, Anderson M T, Likos W J, Mustoe G W. A discrete element model for kaolinite aggregate formation during sedimentation [J]. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 2008, **32**: 965-980
 - [41] Yu A B, Xu B H. Particle-scale modeling of gas-solid flow in fluidization [J]. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, 2003, **78**: 111-121
 - [42] Royer J R, Evans D J, Oyarte L, Guo Q, Kapit E, Mobius M E, Waitukaitis S R, Jaeger H M. High-speed tracking of rupture and clustering freely falling granular streams [J]. *Nature*, 2009, **459**: 1110-1113
 - [43] Hamaker H C. The London-van der Waals attraction between spherical particles [J]. *Physica*, 1937, **4**: 1058-1072
 - [44] Mehrotra V P, Sastry K V S. Pendular bond strength between unequal-sized spherical particles [J]. *Powder Technology*, 1980, **25**: 203-214
 - [45] Lian G, Thornton C, Adams M J. A theoretical study of the liquid bridge forces between two rigid spherical bodies [J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 1993, **161**: 138-147
 - [46] Melrose J C, Wallick G C. Exact geometrical parameters for pendular ring fluid [J]. *Journal of Physical Chemistry*, 1967, **71**: 3676-3677
 - [47] Heady R B, Cahn J W. An analysis of capillary forces in liquid-phase sintering of spherical particles [J]. *Metallurgical Transaction*, 1970, **1**: 185-189
 - [48] Orr F M, Scriven L E, Rivas A P. Pendular rings between solids-meniscus properties and capillary force [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1975, **67**: 723-742
 - [49] Pietsch W, Rumpf H. Adhesion capillary pressure liquid volume and angle of contact of a liquid bridge between 2 spheres [J]. *Chemie Ingenieur Technik*, 1967, **39**: 885-893
 - [50] Pierrat P, Caram H S. Tensile strength of wet granular materials [J]. *Powder Technology*, 1997, **91**: 83-93
 - [51] Urso M E D, Lawrence C J, Adams M J. Pendular, funicular, and capillary bridges: results for two dimensions [J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 1999, **220**: 42-56
 - [52] Melrose J C. Model calculations for capillary condensation [J].

- AIChE Journal*, 1966, **12**: 986-994
- [53] Kruyer S. The penetration of mercury and capillary condensation in packed spheres [J]. *Transactions of the Faraday Society*, 1958, **54**: 1758-1767
- [54] Cross N L, Picknett R C. Liquid layer between a sphere and a plane surface [J]. *Transactions of the Faraday Society*, 1963, **59**: 846-855
- [55] Erle M A, Dyson D C, Morrow N R. Liquid bridges between cylinder, in a torus, and between spheres [J]. *AIChE Journal*, 1971, **17**: 115-121
- [56] Chen Y, Zhao Y, Gao H, Zheng J. Liquid bridge force between two unequal-sized spheres or a sphere and a plane [J]. *Particuology*, 2011, **9**: 374-380
- [57] Zhang R, Li J. Simulation on mechanical behavior of cohesive soil by distinct element method [J]. *Journal of Terramechanics*, 2006, **43**: 303-316
- [58] Hsiau S S, Yang S C. Numerical simulation of self-diffusion and mixing in a vibrated granular bed with the cohesive effect of liquid bridges [J]. *Chemical Engineering Science*, 2003, **58**: 339-351
- [59] Yang S C, Hsiau S S. The simulation of powders with liquid bridges in a 2D vibrated bed [J]. *Chemical Engineering Science*, 2001, **56**: 6837-6849
- [60] Nase S T, Vargas W L, Abatan A A, McCarthy J J. Discrete characterization tools for cohesive granular material [J]. *Powder Technology*, 2001, **116**: 214-223
- [61] Lian G, Thornton C, Adams M J. Discrete particle simulation of agglomerate impact coalescence [J]. *Chemical Engineering Science*, 1998, **53**: 3381-3391
- [62] Gao Hongli (高红利), Chen Youchuan (陈友川), Zhao Yongzhi (赵永志), Zheng Jinyang (郑津洋). Simulation of mixing process for size-type binary wet particulate systems in a rotating horizontal drum by discrete element method [J]. *Acta Physica Sinica (物理学报)*, 2011, **60** (12): 124501
- [63] Ergun S. Fluid flow through packed columns [J]. *Chemical Engineering and Processing*, 1952, **48**: 89-94
- [64] Wen C Y, Yu Y H. Mechanics of fluidization [J]. *Chemical Engineering Progress Symposium Series*, 1966, **62**: 100-111
- [65] Di Felice R. The voidage function for fluid-particle interaction systems [J]. *International Journal of Multiphase Flow*, 1994, **20**: 153-159
- [66] Hoomans B P B, Kuipers J A M, Briels W J, van Swaaij W P M. Discrete particle simulation of bubble and slug formation in a two-dimensional gas-fluidized bed: a hard sphere approach [J]. *Chemical Engineering Science*, 1996, **51**: 99-118
- [67] Xu B H, Yu A B. Numerical simulation of the gas-particle flow in a fluidized bed by combining discrete particle method with computational fluid dynamics [J]. *Chemical Engineering Science*, 1997, **52**: 2785-2809
- [68] Kaneko Y, Shiojima T, Horio M. DEM simulation of fluidized beds for gas-phase olefin polymerization [J]. *Chemical Engineering Science*, 1999, **54**: 5809-5821
- [69] Rong D, Mikami T, Horio M. Particle and bubble movements around tubes immersed in fluidized beds—a numerical study [J]. *Chemical Engineering Science*, 1999, **54**: 5737-5754
- [70] Kawaguchi T, Sakamoto M, Tanaka T, Tsuji Y. Quasi-three-dimensional numerical simulations of spouted beds in cylinder [J]. *Powder Technology*, 2000, **109**: 3-12
- [71] Takeuchi S, Wang S, Rhodes M. Discrete element simulation of a flat-bottomed spouted bed in the 3-D cylindrical coordinate system [J]. *Chemical Engineering Science*, 2004, **59**: 3495-3504
- [72] Limtrakul S, Boonsrirat A, Vatanatham T. DEM modeling and simulation of a catalytic gas-solid fluidized bed reactor: a spouted bed as a case study [J]. *Chemical Engineering Science*, 2004, **59**: 5225-5231
- [73] Tsuji Y, Tanaka T, Ishida T. Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particle in a horizontal pipe [J]. *Powder Technology*, 1992, **71**: 239-250
- [74] Watano S, Saito S, Suzuki T. Numerical simulation of electrostatic charge in powder pneumatic conveying process [J]. *Powder Technology*, 2003, **135/136**: 112-117
- [75] Li J, Webb C, Pandiella S S, Campbell G M, Dyakowski T, Cowell A, McGlinchey D. Solid deposition in low-velocity slug flow pneumatic conveying [J]. *Chemical Engineering and Processing*, 2005, **44**: 167-173
- [76] Ouyang J, Yu A B. Simulation of gas-solid flow in vertical pipe by hard-sphere model [J]. *Particulate Science and Technology*, 2005, **23**: 47-61
- [77] Ouyang J, Li J. Particle-motion-resolved discrete model for simulating gas-solid fluidization [J]. *Chemical Engineering Science*, 1999, **54**: 2077-2083
- [78] Zhao Y, Cheng Y, Wu C, Ding Y, Jin Y. Eulerian-Lagrangian simulation of distinct clustering phenomena and RTDs in riser and downer [J]. *Particuology*, 2010, **8**: 44-50
- [79] Zhao Yongzhi (赵永志), Cheng Yi (程易), Jin Yong (金涌). Kinetic simulation of two-dimensional spouted bed with draft plates by discrete element method [J]. *Chemical Engineering (China) (化学工程)*, 2007, **35** (6): 24-28
- [80] Zhao Yongzhi (赵永志), Cheng Yi (程易). Particle-scale simulation of fluidized bed with immersed tubes [J]. *Chemical Engineering (China) (化学工程)*, 2007, **35** (11): 21-24
- [81] Zhao Y, Jiang M, Liu Y, Zheng J. Particle-scale simulation of the flow and heat transfer behaviors in fluidized bed with immersed tube [J]. *AIChE Journal*, 2009, **55**: 3109-3124
- [82] Tanaka T, Kawaguchi T, Tsuji Y. Discrete particle simulation of flow patterns in 2-dimensional gas-fluidized beds [J]. *International Journal of Modern Physics B*, 1993, **7**: 1889-1898
- [83] Kawaguchi T, Tanaka T, Tsuji Y. Numerical simulation of two-dimensional fluidized beds using the discrete element method (comparison between the two- and three-dimensional models) [J]. *Powder Technology*, 1998, **96**: 129-138
- [84] Lu W M, Ju S P, Tung K L, Lu Y C. Stability analysis of perforated plate type single stage suspension fluidized bed without downcomer [J]. *Korean Journal of Chemical Engineering*, 1999, **16**: 810-817
- [85] Lu H L, Wang S, Zhao Y H, Yang L, Gidaspow D, Ding J M. Prediction of particle motion in a two-dimensional bubbling fluidized bed using discrete hard-sphere model [J]. *Chemical Engineering Science*, 2005, **60**: 3217-3231
- [86] Yuu S, Umekage T, Johno Y. Numerical simulation of air and particle motions in bubbling fluidized bed of small particles [J]. *Powder Technology*, 2000, **110**: 158-168
- [87] Xu B H, Feng Y Q, Yu A B, Chew S J, Zulli P. A numerical and experimental study of gas-solid flow in a fluid-bed reactor [J]. *Powder Handling and Processing*, 2001, **13**: 71-76
- [88] Limtrakul S, Chalermwattanatai A, Unggurawirote K, Tsuji Y, Kawaguchi T, Tanthapanichakoon W. Discrete particle simulation of

- solids motion in a gas-solid fluidized bed [J]. *Chemical Engineering Science*, 2003, **58**: 915-921
- [89] Feng Y Q, Xu B H, Zhang S J, Yu A B, Zulli P. Discrete particle simulation of gas fluidization of particle mixtures [J]. *AIChE Journal*, 2004, **50**: 1713-1728
- [90] Rong D, Horio M. Behavior of particles and bubbles around immersed tubes in a fluidized bed at high temperature and pressure: a DEM simulation [J]. *International Journal of Multiphase Flow*, 2001, **27**: 89-105
- [91] Chu K W, Yu A B. Numerical simulation of complex particle-fluid flows [J]. *Powder Technology*, 2008, **179**: 104-114
- [92] Alobaid F, Ströhle J, Epple B. Extended CFD/DEM model for the simulation of circulating fluidized bed [J]. *Advanced Powder Technology*, 2013, **24**: 403-415
- [93] He Y, Deen N G, van Sint Annaland M, Kuipers J A M. Gas-solid turbulent flow in a circulating fluidized bed riser: experimental and numerical study of monodisperse particle systems [J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2009, **48**: 8091-8097
- [94] Zhu J X, Yu Z Q, Jin Y, Grace J R, Issangya A. Cocurrent downflow circulating fluidized bed (downer) reactors—a state of the art review [J]. *Canadian Journal of Chemical Engineering*, 1995, **73**: 662-677
- [95] Limtrakul S, Thanomboon N, Vatanatham T, Khongprom P. DEM modeling and simulation of a down-flow circulating fluidized bed [J]. *Chemical Engineering Communications*, 2008, **195**: 1328-1344
- [96] Zhao T, Liu K, Cui Y, Takei M. Three-dimensional simulation of the particle distribution in a downer using CFD-DEM and comparison with the results of ECT experiments [J]. *Advanced Powder Technology*, 2010, **21**: 630-640
- [97] Zhao Y, Ding Y, Wu C, Cheng Y. Numerical simulation of hydrodynamics in downers using a CFD-DEM coupled approach [J]. *Powder Technology*, 2010, **199**: 2-12
- [98] Nakamura H, Watano S. Numerical modeling of particle fluidization behavior in a rotating fluidized bed [J]. *Powder Technology*, 2007, **171**: 106-117.
- [99] Nakamura H, Tokuda T, Iwasaki T, Watano S. Numerical analysis of particle mixing in a rotating fluidized bed [J]. *Chemical Engineering Science*, 2007, **62**: 3043-3056
- [100] Nakamura H, Kondo T, Watano S. Improvement of particle mixing and fluidization quality in rotating fluidized bed by inclined injection of fluidizing air [J]. *Chemical Engineering Science*, 2013, **91**: 70-78
- [101] Jiang Maoqiang (江茂强), Zhao Yongzhi (赵永志), Zheng Jinyang (郑津洋). Simulation of the behavior of gas-solid flow in a novel rotating fluidized bed in a static geometry [J]. *The Chinese Journal of Process Engineering (过程工程学报)*, 2009, **9** (S2): 175-179
- [102] Yang S, Luo K, Fang M, Zhang K, Fan J. Parallel CFD-DEM modeling of the hydrodynamics in a lab-scale double slot-rectangular spouted bed with a partition plate [J]. *Chemical Engineering Journal*, 2014, **236**: 158-170
- [103] Hassani M A, Zarghami R, Norouzi H R, Mostoufi N. Numerical investigation of effect of electrostatic forces on the hydrodynamics of gas-solid fluidized beds [J]. *Powder Technology*, 2013, **246**: 16-25
- [104] Di Renzo A, Di Maio F P. Homogeneous and bubbling fluidization regimes in DEM-CFD simulations: hydrodynamic stability of gas and liquid fluidized beds [J]. *Chemical Engineering Science*, 2007, **62**: 116-130
- [105] Di Renzo A, Cello F, Di Maio F P. Simulation of the layer inversion phenomenon in binary liquid-fluidized beds by DEM-CFD with a drag law for polydisperse systems [J]. *Chemical Engineering Science*, 2011, **66**: 2945-2958
- [106] Wang S, Guo S, Gao J, Lan X, Dong Q, Li X. Simulation of flow behavior of liquid and particles in a liquid-solid fluidized bed [J]. *Powder Technology*, 2012, **224**: 365-373
- [107] Li T, Guenther C. MFI-X-DEM simulations of change of volumetric flow in fluidized beds due to chemical reactions [J]. *Powder Technology*, 2012, **220**: 70-78
- [108] Geng Y, Che D. An extended DEM-CFD model for char combustion in a bubbling fluidized bed combustor of inert sand [J]. *Chemical Engineering Science*, 2011, **66**: 207-219
- [109] Liu D, Chen X, Zhou W, Zhao C. Simulation of char and propane combustion in a fluidized bed by extending DEM-CFD approach [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2011, **33**: 2701-2708
- [110] Simsek E, Brosch B, Wirtz S, Scherer V, Krüll F. Numerical simulation of grate firing systems using a coupled CFD/discrete element method (DEM) [J]. *Powder Technology*, 2009, **193**: 266-273
- [111] Zhou H, Mo G, Zhao J, Cen K. DEM-CFD simulation of the particle dispersion in a gas-solid two-phase flow for a fuel-rich/lean burner [J]. *Fuel*, 2011, **90**: 1584-1590
- [112] Wu C, Cheng Y, Ding Y, Jin Y. CFD-DEM simulation of gas-solid reacting flows in fluid catalytic cracking (FCC) process [J]. *Chemical Engineering Science*, 2010, **65**: 542-549
- [113] Wu C, Yan B, Jin Y, Cheng Y. Modeling and simulation of chemically reacting flows in gas-solid catalytic and non-catalytic processes [J]. *Particuology*, 2010, **8**: 525-530
- [114] Xiang J S, McGlinchey D. Numerical simulation of particle motion in dense phase pneumatic conveying [J]. *Granular Matter*, 2004, **6**: 167-172
- [115] Li J, Webb C, Pandiella S S, Campbell G M, Dykowski T, Cowell A, McGlinchey D. Solids deposition in low-velocity slug flow pneumatic conveying [J]. *Chemical Engineering and Processing*, 2005, **44**: 167-173
- [116] Li J T, Mason D J. A computational investigation of transient heat transfer in pneumatic transport of granular particles [J]. *Powder Technology*, 2000, **112**: 273-282
- [117] Lim E W C, Wang C H, Yu A B. Discrete element simulation for pneumatic conveying of granular material [J]. *AIChE Journal*, 2006, **52**: 496-509
- [118] Lim E W C, Zhang Y, Wang C H. Effects of an electrostatic field in pneumatic conveying of granular materials through inclined and vertical pipes [J]. *Chemical Engineering Science*, 2006, **61**: 7889-7908
- [119] Fraige F Y, Langston P A. Horizontal pneumatic conveying: a 3D distinct element model [J]. *Granular Matter*, 2006, **8**: 67-80
- [120] Zhang Y, Lim E W C, Wang C H. Pneumatic transport of granular materials in an inclined conveying pipe: comparison of computational fluid dynamics-discrete element method (CFD-DEM), electrical capacitance tomography (ECT), and particle image velocimetry (PIV) results [J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2007, **46**: 6066-6083
- [121] Kuang S B, Chu K W, Yu A B, Zou Z S, Feng Y Q. Computational investigation of horizontal slug flow in pneumatic conveying [J].

- Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2008, **47**: 470-480
- [122] Kawaguchi T, Tanaka T, Tsuji Y. Numerical analysis of density wave in dense gas-solid flows in a vertical pipe [J]. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, 2000, **138**: 696-701
- [123] Xu M, Ge W, Li J H. A discrete particle model for particle-fluid flow with considerations of sub-grid structures [J]. *Chemical Engineering Science*, 2007, **62**: 2302-2308
- [124] Chu K W, Wang Bo, Xu D L, Chen Y X, Yu A B. CFD-DEM simulation of the gas-solid flow in a cyclone separator [J]. *Chemical Engineering Science*, 2011, **66**: 834-847
- [125] Feng Y Q, Pinson D, Yu A B, Chew S J, Zulli P. Numerical study of gas-solid flow in the raceway of a blast furnace [J]. *Steel Research International*, 2003, **74**: 523-530
- [126] Nogami H, Yamaoka H, Takanani K. Raceway design for the innovative blast furnace [J]. *ISIJ International*, 2004, **44**: 2150-2158
- [127] Umekage T, Yuu S, Kadowaki M. Numerical simulation of blast furnace raceway depth and height, and effect of wall cohesive matter on gas and coke particle flows [J]. *ISIJ International*, 2005, **45**: 1416-1425
- [128] Yuu S, Umekage T, Miyahara T. Prediction of stable and unstable flows in blast furnace raceway using numerical simulation methods for gas and particles [J]. *ISIJ International*, 2005, **45**: 1406-1415
- [129] Singh V, Gupta G S, Sarkar S. Study of gas cavity size hysteresis in a packed bed using DEM [J]. *Chemical Engineering Science*, 2007, **62**: 6102-6111
- [130] Nakamura H, Iwasaki T, Watano S. Numerical simulation of film coating process in a novel rotating fluidized bed [J]. *Chemical & Pharmaceutical Bulletin*, 2006, **54**: 839-846
- [131] Hilton J E, Ying D Y, Cleary P W. Modelling spray coating using a combined CFD-DEM and spherical harmonic formulation [J]. *Chemical Engineering Science*, 2013, **99**: 141-160
- [132] Chou C S, Tseng C Y, Smid J, Kuo J T, Hsiao S S. Numerical simulation of flow patterns of disks in the asymmetric louvered-wall moving granular filter bed [J]. *Powder Technology*, 2000, **110**: 239-245
- [133] Chou C S, Lee A F, Yeh C H. Gas-solid flow in a two-dimensional cross-flow moving granular filter bed with asymmetric boundary [J]. *Particle & Particle Systems Characterization*, 2007, **24**: 210-222
- [134] Eppinger T, Seidler K, Kraume M. DEM-CFD simulations of fixed bed reactors with small tube to particle diameter ratios [J]. *Chemical Engineering Journal*, 2011, **166**: 324-331
- [135] Natsui S, Ueda S, Nogami H, Kano J, Inoue R, Ariyama T. Gas-solid flow simulation of fines clogging a packed bed using DEM-CFD [J]. *Chemical Engineering Science*, 2012, **71**: 274-282
- [136] Tabib M V, Johansen S T, Amini S. A 3D CFD-DEM methodology for simulating industrial scale packed bed chemical looping combustion reactors [J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2013, **52**: 12041-12058
- [137] Li J T, Mason D J. Application of the discrete element modeling in air drying of particulate solids [J]. *Drying Technology*, 2002, **20**: 255-282
- [138] Shi D, Vargas W L, McCarthy J J. Heat transfer in rotary kilns with interstitial gases [J]. *Chemical Engineering Science*, 2008, **63**: 4506-4516
- [139] Han T, Kalman H, Levy A. DEM simulation of particle comminution in jet milling [J]. *Particulate Science and Technology*, 2002, **20**: 325-340
- [140] Goldschmidt M J V, Weijers G G C, Boerefijn R, Kuipers J A M. Discrete element modeling of fluidized bed spray granulation [J]. *Powder Technology*, 2003, **138**: 39-45
- [141] Kafui K D, Thornton C. Fully-3D DEM simulation of fluidized bed spray granulation using an exploratory surface energy-based spray zone concept [J]. *Powder Technology*, 2008, **184**: 177-188
- [142] Dong K J, Guo B Y, Chu K W, Yu A B, Brake I. Simulation of liquid-solid flow in a coal distributor [J]. *Minerals Engineering*, 2008, **21**: 789-796.
- [143] Guo Y, Wu C Y, Kafui K D, Thornton C. Numerical analysis of density-induced segregation during die filling [J]. *Powder Technology*, 2009, **197**: 111-119
- [144] Jayasundara C T, Yang R Y, Guo B Y, Yu A B, Rubenstein J. Effect of slurry properties on particle motion in IsaMills [J]. *Minerals Engineering*, 2009, **22**: 886-892
- [145] Wong W, Fletcher D F, Traini D, Chan H K, Young P M. The use of computational approaches in inhaler development [J]. *Advanced Drug Delivery Reviews*, 2012, **64**: 312-322
- [146] Fernández X R, Nirschl H. Simulation of particles and sediment behavior in centrifugal field by coupling CFD and DEM [J]. *Chemical Engineering Science*, 2013, **94**: 7-19
- [147] Tan Y, Zhang H, Yang D, Jiang S, Song J, Sheng Y. Numerical simulation of concrete pumping process and investigation of wear mechanism of the piping wall [J]. *Tribology International*, 2012, **46**: 137-144
- [148] Varga M, Goniva C, Adam K, Badisch E. Combined experimental and numerical approach for wear prediction in feed pipes [J]. *Tribology International*, 2013, **65**: 200-206
- [149] Tsuji T, Yabumoto K, Tanaka T. Spontaneous structures in three-dimensional bubbling gas-fluidized bed by parallel DEM-CFD coupling simulation [J]. *Powder Technology*, 2008, **184**: 132-140
- [150] Kafui D K, Johnson S, Thornton C, Seville J P K. Parallelization of a Lagrangian-Eulerian DEM/CFD code for application to fluidized beds [J]. *Powder Technology*, 2011, **207**: 270-278
- [151] Jajcevic D, Siegmund E, Radeke C, Khinast J G. Large-scale CFD-DEM simulations of fluidized granular systems [J]. *Chemical Engineering Science*, 2013, **98**: 298-310
- [152] Amritkar A, Deb S, Tafti D. Efficient parallel CFD-DEM simulations using OpenMP [J]. *Journal of Computational Physics*, 2014, **256**: 501-519
- [153] Zhou Z Y, Pinson D, Zou R P, Yu A B. Discrete particle simulation of gas fluidization of ellipsoidal particles [J]. *Chemical Engineering Science*, 2011, **66**: 6128-6145
- [154] Ren B, Zhong W, Chen Y, Chen X, Jin B, Yuan Z, Lu Y. CFD-DEM simulation of spouting of corn-shaped particles [J]. *Particulate Science and Technology*, 2012, **30**: 562-572
- [155] Guo Y, Wu C Y, Thornton C. Modeling gas-particle two-phase flows with complex and moving boundaries using DEM-CFD with an immersed boundary method [J]. *AIChE Journal*, 2013, **59**: 1075-1087